

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor: Matěj Konvalinka

Název práce: Analýza srážkových procesů v kvantové mechanice s použitím Siegertových stavů

Studijní program a obor: fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2021

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.

Pracoviště: ÚTF MFF UK

Kontaktní e-mail: Karel.Houfek@mff.cuni.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné    vzhledem k rozsahu přiměřený počet    méně podstatné četné    závažné

## Výsledky:

- originální    původní i převzaté    netriviální kompilace    citované z literatury    opsané

## Rozsah práce:

- veliký    standardní    dostatečný    nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné    vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet    četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

## Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Autor se ve své práci seznámil se základy teorie rozptylu, včetně pokročilé partie analytických vlastností S-matice, a dále s použitím R-maticové metody s B-splineovou bází pro numerické řešení radiální Schrödingerovy rovnice. Napsal vlastní program založený na této metodě, který umožňuje hledat póly S-matice v komplexní rovině a zkoumat vliv tzv. Sigertových stavů odpovídajících těmto pólům na struktury v účinných průřezech. Demonstroval funkčnost těchto programů na problému s konečnou pravoúhlou potenciálovou jámou, pro kterou je známé analytické řešení a pro niž lze dobře ověřovat numerické výsledky. Přestože byl tento systém již podrobně popsán v literatuře, uchazeč objevil nerezonanční pól S-matice s nestandardním chováním při změně hloubky potenciálu, který nebyl dříve studován.

Práce je velmi dobře strukturovaná. Po přehledném shrnutí základní teorie potřebné pro popis studovaného systému, jeho řešení pomocí R-maticové metody a použitých numerických metod v prvních dvou kapitolách, jsou hlavní výsledky práce obsaženy v třetí kapitole. Zde je největší část věnována studiu pohybu pólů S-matice v komplexní rovině hybností v závislosti na hloubce potenciálové jámy a dále různým technikám odebrání pólů z elementů S-matice, aby bylo možné posoudit vliv jednotlivých pólů na výsledný účinný průřez. Čtvrtá kapitola obsahuje ucelenou a jasnou diskuzi výsledků, kde jsou zdůrazněny výhody a nevýhody jednotlivých použitých metod a technik odstraňování pólů S-matice.

Pokud jde o odbornou stránku, vyskytuje se v předložené práci několik převážně terminologických nepřesností, které ovšem nemají vliv na obdržené výsledky:

- 1) V kapitole 1 je v rovnici (1.3) kvantové číslo  $m$  (projekce momentu hybnosti do osy  $z$ ) položeno bez uvedení důvodu rovno nule (v principu může být libovolné), i když později v kontextu rozptylových řešení hledaných s okrajovou podmínkou (1.29) má tato volba své opodstatnění.
- 2) Striktně řečeno veličina  $p$  zavedená v rovnicích (1.3) a (1.4) není hybnost částice, ale velikost vlnového vektoru. Ovšem později v atomových jednotkách se tento rozdíl stírá.
- 3) Na konci podkapitoly 1.1.3 je uvedeno, že u fázového posuvu a účinného průřezu pro moment hybnosti  $l = 3$  na obr. 1.1 a 1.2 pozorujeme typické rezonanční chování. Tento příklad je zvolen poněkud nešťastně, protože o „typické“ rezonanční chování nejde. Jednak se fázový posuv mění o zhruba  $\pi/4$  a ne o  $\pi$ , navíc v samotné práci je později ukázáno, že tvar zobrazeného účinného průřezu není dán žádným pólem S-matice. Bylo by asi vhodnější zvolit jako ilustrační příklad případ s  $U_0 = 30 a^{-2}$ , který vykazuje jasné rezonanční chování.
- 4) V podkapitole 1.2 je zavedena S-matice pomocí vztahu (1.47). Ve skutečnosti jde pouze o element S-matice odpovídající momentu hybnosti  $l$  a takto zavedená „S-matice“ jako funkce  $p$  by měla mít index  $l$ , podobně jako ho má odpovídající účinný průřez v rovnici (1.46). Není pravda, že S-matice je „matice“ jen pro nesférické potenciály. Pro sféricky symetrický potenciál jde o diagonální matici s funkcemi  $S_l(p)$  na diagonále.
- 5) V podkapitole 2.3 je nesprávně uvedeno, že Gaussova-Legendrova kvadratura o  $m$  bodech integruje přesně polynomy do stupně  $2m$ . Správně má být do stupně  $2m - 1$ .

Přestože se předložená práce čte poměrně dobře, objevují se v ní také drobné jazykové nedostatky a občas nekonzistentní značení, kterým by se dalo vyhnout opětovným pozorným přečtením celé práce. Níže uvádím několik příkladů, i když jsou v práci další nepodstatné překlepy:

- 1) V práci je přecházeno od značení pro velikost vlnového vektoru („hybnosti“)  $p$  ke  $k$  (viz např. podkapitola 1.1.3) a zase zpět.
- 2) V kapitole 1 je zaveden v rovnici (1.9) potenciál  $V(r)$  se zápornou hodnotou  $V_0$ . Později v práci je však již používána výhradně redukovaná hodnota potenciálu  $U_0$ , která je všude brána jako kladná (tj. značí hloubku potenciálu). Bylo by asi vhodné již potenciál v (1.9) zavést konzistentně jako  $-V_0$ .
- 3) V rovnici (1.74) je na pravé straně navíc Riccatiho-Hankelova funkce. V rovnicích (1.73)-(1.75) vypadl u funkce  $R(E)$  index  $l$ .
- 4) V části 3.3.4 v prvním odstavci je dvakrát za sebou „p blízké nule“.
- 5) V názvu části 4.2 je „Fázový posuvy“ místo „Fázové posuvy“.

I přes výše uvedené věcné a jazykové nedostatky považuji předloženou práci za velmi zdařilou, obsahující řadu zajímavých výsledků, které mohou pomoci při interpretaci struktur účinných průřezu složitějších systémů a na které lze navázat v případné diplomové práci.

#### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

- 1) V práci zmiňujete problém s přesností numerického určení vlastních stavů pravoúhlé potenciálové jámy, kdy bylo nutné použít velký počet básových B-splineových funkcí na rozdíl od coulombického potenciálu. Mohl by tento problém souviset s nepřesným vyčíslením maticových elementů potenciálu, který obsahuje skok? Z textu práce není zcela jasné, jak přesně byla integrace prováděna. Byl potřebný integrál rozdělen tak, aby jedna z hranic integrace byla právě v bodě skoku potenciálu? Pokud tomu tak nebylo, nelze očekávat, že bude integrace pomocí Gaussovy-Legendrovy kvadratury přesná, protože nejsou splněny předpoklady hladkosti integrované funkce.
- 2) Zkoumal jste, zda se neobvyklý „nerezonanční pól“, který se pro pravoúhlou potenciálovou jámu objevuje pro záporné energie a má zápornou imaginární částí, objeví i u jiných potenciálů, např. u exponenciálního nebo Morseova potenciálu?
- 3) Pro hledání pólů S-matice se také používá metoda komplexního škálování, při které se Siegertovy stavy s komplexní energií určují stejně jako vázané stavy přímo diagonalizací komplexně škálovaného Hamiltoniánu. Slyšel jste o této metodě?

#### **Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

#### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze dne 30. 6. 2021